Machine Translated by Google

SCIENTIFIC DATA

ABIERTO

CATEGORÍAS DE TEMAS

» Métodos computacionales

» Superficies, interfaces y películas delgadas

» Densidad funcional teoría

Recibido: 03 de junio de 2016

Aceptado: 11 de agosto de 2016

Publicado: 13 de septiembre de 2016

Descriptor de datos: Energías superficiales de cristales elementales

Richard Tran[1], Zihan Xu[1], Balachandran Radhakrishnan[1], Donald Winston[2], Wenhao Sun[3], Kristin A. Persson[2,4] y Shyue Ping Ong[1]

La energía superficial es una propiedad fundamental de las diferentes facetas de un cristal, crucial para comprender diversos fenómenos como la segregación superficial, la rugosidad, la actividad catalítica y la forma de equilibrio del cristal. Estos fenómenos superficiales son especialmente importantes a escala nanométrica, donde la gran relación superficie-volumen da lugar a propiedades significativamente diferentes de las del volumen. En este trabajo, presentamos la mayor base de datos de energías superficiales calculadas para cristales elementales hasta la fecha. Esta base de datos contiene las energías superficiales de más de 100 polimorfos de aproximadamente 70 elementos, con un índice de Miller máximo de dos y tres para cristales cúbicos y no cúbicos, respectivamente. También se incluyen esquemas de reconstrucción conocidos. La base de datos es sistemáticamente mejorable y ha sido rigurosamente validada con datos experimentales y computacionales previos, cuando están disponibles. Describiremos la metodología empleada para construir la base de datos y cómo acceder a ella para estudios posteriores y el diseño de materiales.

Tipo(s) de diseño	objetivo de creación de base de datos
Tipo(s) de medición	energía superficial
Tipo(s) de tecnología	física del estado sólido
Tipo(s) de factor	
Característica(s) de la muestra	

[1] Departamento de Nanoingeniería, Universidad de California en San Diego, 9500 Gilman Dr, Código postal 0448, La Jolla, California 92093-0448, EE. UU. [2] Área de Tecnologías Energéticas, Laboratorio Nacional Lawrence Berkeley, Berkeley, California 94720, EE.UU. [3] Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales, Instituto Tecnológico de Massachusetts, Cambridge, Massachusetts 02139, EE. UU. [4] Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales, Universidad de California, Berkeley, California 94720-1760, EE. UU. La correspondencia y las solicitudes de materiales deben dirigirse a la SPO (correo electrónico: ongsp@eng.ucsd.edu).

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

Antecedentes y resumen: Las
propiedades superficiales de un cristal son cruciales para la comprensión y el diseño de materiales para diversas aplicaciones. Por ejemplo, tecnologías como las pilas de combustible y la fabricación de productos químicos industriales requieren el uso de catalizadores para acelerar las reacciones químicas, un proceso fundamentalmente controlado por la superficie1–9 .
Los efectos superficiales son especialmente importantes en los nanomateriales, donde las relaciones relativamente grandes entre el área superficial y el volumen dan lugar a propiedades que difieren significativamente de las del material en masa10–14. Por ejemplo, la estabilidad a nanoescala de los polimorfos metaestables se determina a partir de la competencia entre la energía superficial y la energía en masa de la nanopartícula15–18.

La estabilidad de una superficie se describe mediante su energía superficial γ, una medida del exceso de energía de los átomos superficiales debido a diversos factores, como la ruptura de enlaces que produce átomos subcoordinados. Esta magnitud fundamental es importante para comprender la estructura, la reconstrucción, la rugosidad y la forma de equilibrio del cristal19. A pesar de su importancia, la determinación experimental de las energías superficiales, especialmente para facetas específicas, es difícil y poco frecuente20–24. Además, las formas de Wulff observadas experimentalmente suelen ser inconsistentes entre estudios debido a la sensibilidad de las facetas de alta energía a la temperatura y las impurezas25. Las referencias 26 y 20 han recopilado un amplio conjunto de datos de energía superficial elemental metálica mediante la extrapolación de la tensión superficial de fases líquidas para superficies sólidas. Mills et al.27 y Keene28 han recopilado revisiones de dichas técnicas de tensión superficial .

Los cálculos de primeros principios, como los basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), son herramientas complementarias importantes a las técnicas experimentales para caracterizar las propiedades superficiales de un material29–31. Las técnicas computacionales proporcionan los medios para controlar con precisión la estructura y la composición de la superficie. De hecho, existen numerosos estudios computacionales de superficies, tanto fundamentales como orientados a aplicaciones, en la literatura8,32–34. A mayor escala, Vitos et al.35 compilaron previamente una base de datos de energías superficiales para todos los metales hasta el Pu utilizando el método DFT de densidad de carga completa (FCD), una técnica basada en el acoplamiento del método orbital lineal muffin-tin y la aproximación atómica-esfera36.
Sin embargo, esta base de datos está limitada a superficies de cristales en estado fundamental hasta un índice de Miller (MMI) máximo de 1 únicamente.

Los desafíos para la determinación de propiedades superficiales mediante DFT son triples. En primer lugar, la elección del funcional de correlación de intercambio, así como otros parámetros como pseudopotenciales, malla de integración, etc., pueden afectar significativamente la precisión y la convergencia de las energías superficiales, lo que a su vez genera valores generalmente difíciles de comparar entre diferentes trabajos37. En segundo lugar, el enfoque típico de "losa" para realizar cálculos de energía superficial requiere el uso de grandes superceldas con la introducción de una gran región de vacío, lo que hace que dichos cálculos sean computacionalmente intensivos, especialmente para materiales de baja simetría e índices de Miller altos. Finalmente, algunas superficies se someten a una reconstrucción significativa para reducir la energía superficial y aumentar la estabilidad; el ejemplo más notorio es la reconstrucción 7 × 7 de la superficie Si (111)38–40. Para que los algoritmos de optimización de geometría DFT identifiquen la estructura superficial de energía mínima global, se necesita una estimación inicial razonable para la superficie reconstruida para evitar la relajación a un mínimo local, y dichas estimaciones iniciales son difíciles de determinar a priori sin información experimental.

En este trabajo, presentamos una gran base de datos de energías superficiales y formas Wulff de más de 100 polimorfos de aproximadamente 70 elementos construidos mediante cálculos DFT de alto rendimiento. Los cristales elementales estudiados incluyen todos los polimorfos disponibles en el Proyecto de Materiales (https://www.materialsproject.org)41 y las químicas cubiertas incluyen tanto metales como no metales. Se calcularon todas las superficies hasta un índice de Miller absoluto máximo (MMI) de 2 y 3 para cristales no cúbicos y cúbicos, respectivamente. Para abordar el primer y segundo desafío descritos anteriormente, se desarrolló un flujo de trabajo computacional robusto basado en el esquema de convergencia eficiente propuesto por Sun et al.42 para automatizar la gran cantidad de cálculos de varios pasos. Para abordar parcialmente el tercer desafío, incluimos reconstrucciones bien conocidas, como las reconstrucciones de fila faltante (110) y hexagonal (111) para las superficies cúbicas centradas en las caras43,44 en nuestro conjunto de datos. Todos los datos se han puesto a disposición del público a través de la aplicación web Crystalium en el sitio web de Materials Virtual Lab (http://crystalium.materialsvirtuallab.org), así como en la interfaz gráfica de usuario del Proyecto de Materiales y la Interfaz de Programación de Aplicaciones (API) RESTful41,45.

El conjunto de datos completo también está disponible como archivo JSON en el repositorio Dryad (Cita de datos 1). Demostramos que las energías superficiales calculadas concuerdan perfectamente con los valores experimentales disponibles. También proporcionaremos una evaluación del efecto de las reconstrucciones de superficie en la precisión de los datos.

Métodos

Generación de modelos de losa

El enfoque utilizado para calcular las energías superficiales en este trabajo es el modelo de losa típico, en el que se genera una supercelda del cristal orientada para exponer la superficie relevante de interés y se eliminan los átomos de una parte de la supercelda para crear un vacío. Se da un ejemplo en la Fig. 1. Partiendo de la celda unitaria convencional, se realiza una serie de transformaciones de vectores reticulares para crear una celda unitaria "orientada" (OUC) donde los vectores reticulares a y b son paralelos al plano con índices de Miller (hkl) y el vector reticular c no es paralelo al plano. Se debe tener en cuenta que el vector c no es necesariamente perpendicular al plano42, aunque se utiliza el vector "más ortogonal" que se puede obtener dentro de un tamaño de celda razonable. Luego, la OUC se extiende por múltiplos del vector reticular c y se eliminan los átomos para generar el modelo de losa con un espesor de losa y vacío deseado. Para obtener todas las terminaciones simétricamente distintas para un plano dado, los átomos en el OUC se desplazan en la dirección c antes de la extensión a

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

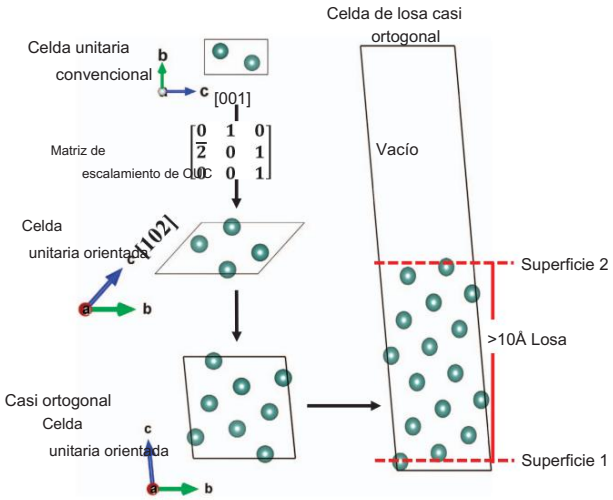

Figura 1. Construcción de losa. Construcción de la losa Y ð1012Þ a partir de la celda unitaria convencional. Nótese que la c
El vector reticular no necesariamente necesita ser perpendicular.

Generar el modelo de losa. Todas las losas generadas están limitadas a superficies superiores e inferiores simétricas.
El algoritmo de generación de modelos se ha implementado en Python Materials Genomics (pymatgen)
Biblioteca de análisis de materiales46, con un conjunto completo de pruebas unitarias para garantizar un funcionamiento sólido de
el código.

Metodología computacional

Para un modelo de losa dado de una faceta con índice de Miller (hkl), la energía superficial γσ hkl viene dada por lo siguiente
expresión:

$$\gamma_{\sigma hkl} = \frac{E_{hkl:\sigma\ losa} - E_{hkl\ a\ granel} \cdot nslab}{2 \cdot Aslab} \quad \delta 1 \text{Þ}$$

donde, $E_{hkl:\sigma\ losa}$ es la energía total del modelo de losa con terminación σ, es la energía por átomo del $E_{hkl\ a\ granel}$
OUC a granel, nslab es el número total de átomos en la estructura de la losa, Aslab es el área de superficie de la losa
estructura, y el factor de 2 en el denominador representa las dos superficies en el modelo de losa.
converger eficientemente la energía superficial, tanto la energía en masa como la energía de la losa se calcularon utilizando el OUC,
lo que permite utilizar cuadrículas de integración recíproca consistentes para los cálculos de volumen y losa42,47 .
La OUC estaba completamente relajada tanto en el volumen celular como en las posiciones atómicas, mientras que las losas estaban relajadas en el
Sólo posiciones atómicas.

Todos los cálculos de energía DFT48,49 se realizaron utilizando el paquete de simulación ab initio de Viena.
(VASP)50–52 dentro del enfoque de onda aumentada del proyector (PAW)53 . Los efectos de intercambio-correlación
se modelaron utilizando la aproximación de gradiente generalizado (GGA) de Perdew-Berke-Ernzerhof (PBE)54
funcional, y todos los cálculos fueron polarizados por espín con una energía de corte de onda plana de 400 eV.
Los pseudopotenciales utilizados son similares a los utilizados en el Proyecto de Materiales46. Las energías y fuerzas atómicas
10^{-6} eV y 10^{-1} Se convergieron eV $Å^{-1}$ de todos los cálculos dentro de 10 respectivamente. Se eligió el método de Methfessel-Paxton55 como
algoritmo de difuminado, y se utilizó el esquema de iteración de Davidson bloqueado56.
Se eligió como algoritmo de minimización de electrones y los iones se actualizaron utilizando el gradiente conjugado.
Algoritmo. Se utilizaron mallas de puntos k centradas en Γ de $\frac{50}{a}$, $\frac{50}{b}$, $\frac{50}{c}$ y $\frac{50}{a}$, $\frac{50}{b}$, $\frac{50}{c}$ para los cálculos de OUC y losas.
respectivamente con valores no enteros redondeados al entero más cercano. A través de una serie de
Mediante pruebas de convergencia exhaustivas, se determinó que espesores de vacío y de losa de al menos 10 Å
fueron suficientes para garantizar que las energías superficiales convergieran dentro de 0,02 J m^{-2}.

Forma de Wulff

La construcción de Wulff da la forma del cristal en condiciones de equilibrio19,57,58. En esta construcción,
La distancia de una faceta desde el centro del cristal es proporcional a la energía superficial de esa faceta, y la
La envoltura convexa interna de todas las facetas forma la forma de Wulff. Aquí, utilizamos la metodología desarrollada por
Miracle-Sole58 para construir la forma de Wulff. Un ejemplo de la forma de Wulff del Fe se muestra en la Fig. 2a.
que contiene todas las superficies hasta un MMI de 3. Para ilustrar la importancia de muestrear valores más altos de Miller
superficies de índice para obtener una forma Wulff precisa, la forma Wulff de Fe hasta MMI de 1 se muestra en
Fig. 2b. Es evidente que la inclusión de superficies de mayor índice es necesaria para producir una precisión
Descripción de la forma del cristal de equilibrio.

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

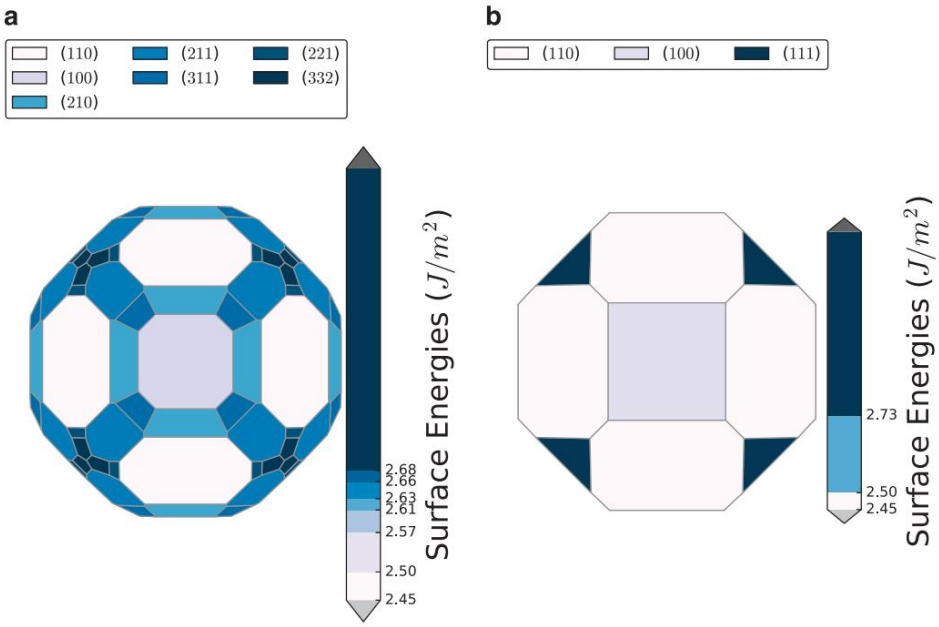

Figura 2. Forma de Wulff de Fe. La forma de Wulff de α-Fe generada con energías superficiales para facetas de hasta un máximo Índice de Miller de (a) 3 y (b) 1.

La fracción de área f $^{A}_{hkl}$ de cada faceta simétricamente distinta en condiciones de equilibrio puede ser Se determina a partir de la forma de Wulff. Definimos la energía superficial ponderada γ utilizando esta fracción, como se indica en la siguiente ecuación:

$$\bar{\gamma} = \frac{\sum_{hkl} \gamma_{hkl} A_{hkl}}{\sum A_{hkl}} = \sum_{hkl} \gamma_{hkl} f^{A}_{hkl} \qquad (2)$$

donde γhkl es la energía superficial de una faceta única existente en la forma de Wulff, Ahkl es el área total de todas facetas de la familia {hkl} en la forma de Wulff, y f es la fracción de área de la familia {hkl} en la forma de Wulff $^{A}_{hkl}$ forma. En este trabajo, γ se utiliza como base para la comparación con energías superficiales determinadas experimentalmente, para $\bar{\gamma}$ del cual normalmente solo se informa un valor.

Medidas de anisotropía

Se han propuesto varias medidas de anisotropía superficial en la literatura. Por ejemplo, la relación γ111/γ110 se utiliza con frecuencia para metales fcc y bcc, pero dichas medidas específicas de la superficie carecen de generalidad. Aplicabilidad en cristales de diferente simetría. La medida general más utilizada de La anisotropía es el factor de forma η, que viene dado por la siguiente ecuación:

$$\eta = \frac{A}{V^{2/3}} \qquad (3)$$

donde A y V son el área superficial y el volumen de la forma de Wulff, respectivamente. El factor de forma es a Cantidad útil para determinar el tamaño crítico del núcleo19. Normalmente, el factor de forma se compara con la de una esfera ideal (η = (36π)$^{1/3}$), y un η mayor indica una mayor anisotropía.

Aunque es de aplicación general, η no tiene en cuenta la variación de las energías superficiales, excepto indirectamente. a través de su impacto en la forma de Wulff. En la base de datos, hemos proporcionado una definición alternativa de anisotropía de energía superficial αγ dada por la siguiente ecuación:

$$\alpha_\gamma = \frac{\sum_{hkl} |\gamma_{hkl} - \bar{\gamma}| A_{hkl}}{\bar{\gamma} \sum_{hkl} A_{hkl}} \qquad (4)$$

αγ puede verse efectivamente como un coeficiente de variación de las energías superficiales que está normalizado para Comparación entre cristales con diferentes energías superficiales ponderadas. Un cristal perfectamente isótropo... tiene αγ = 0. αγ es comparable entre diferentes sistemas cristalinos y representa todas las superficies en función de su importancia relativa (en términos de contribución a la forma de Wulff).

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

Alcance de los
datos. La versión actual de la base de datos contiene energías superficiales y formas Wulff de más de 100 polimorfos de aproximadamente 70 elementos. Esta base de datos tiene un alcance mucho mayor que las compilaciones anteriores de energías superficiales en varios aspectos importantes:

1. Se incluyen tanto metales como no metales.
2. Se incluyen todos los polimorfos de cada elemento disponibles en la base de datos del Proyecto de Materiales. Esto contrasta con trabajos anteriores, donde solo se estudiaron las estructuras cristalinas en estado fundamental más estables.
3. Se calcularon todas las superficies hasta un índice de Miller (MMI) máximo de dos y tres para todos los cristales cúbicos y no cúbicos, respectivamente. Los grupos espaciales más comunes entre los cristales muestreados son Fm m, Im m, P /mmc y Fd m, que contienen 13, 13, 12 y 13 superficies simétricamente distintas, respectivamente, hasta el MMI utilizado en este trabajo. Las únicas excepciones son los cristales en estado fundamental de Mn, S, P, Se y B, para los cuales solo se calcularon las terminaciones y las superficies con el menor número de enlaces rotos debido a la baja simetría o al gran tamaño de las celdas unitarias.
4. Se incorporan esquemas de reconstrucción conocidos. En el momento de redactar este documento, los esquemas considerados son las reconstrucciones Fm3m (110) 2 × 1 con fila faltante y (111) 1 × 1 hexagonal, y Fd3m (111) 2 × 1, (110) 1 × 1 y (100)p 2 × 1.

Esta base de datos se mejorará sistemáticamente mediante actualizaciones continuas. Las futuras actualizaciones incluirán MMI más altos y otros esquemas de reconstrucción de superficies, como las conocidas superficies fcc(100)-hexadecimales59. También se planea una mayor expansión a no elementos, como binarios, ternarios, etc., en una etapa posterior.

Flujo de trabajo para el cálculo de
superficies. La Figura 3 muestra un esquema del flujo de trabajo de alto rendimiento utilizado en este trabajo, implementado con el paquete de software FireWorks60. Los cristales iniciales se obtuvieron consultando todos los cristales elementales del Proyecto de Materiales a través de la API de Materiales45. Se generaron automáticamente todos los OUC hasta el MMI para cada cristal. Para cada OUC (correspondiente a un índice de Miller específico [hkl]), se realizó una relajación completa, y a partir del OUC completamente relajado se generaron y calcularon los modelos de losa para las distintas terminaciones. Para gestionar los errores que pudieran surgir durante los cálculos, se utilizó el paquete de software custodio46 como envoltorio de VASP, junto con un conjunto de reglas robustas de gestión de errores.
Los resultados de los cálculos exitosos se insertaron automáticamente en una base de datos documental MongoDB. Los metadatos de los cálculos DFT y las propiedades superficiales extraídas (véanse las Tablas 1 y 2) se insertaron posteriormente en la base de datos del Proyecto de Materiales y en el repositorio Dryad.

Se diseñaron comprobaciones de consistencia como parte del flujo de trabajo para detectar posibles errores y comportamientos anómalos en los cálculos de superficie. Los cálculos que contienen dichas anomalías se etiquetan con una advertencia que incluye una lista de sus breves descripciones. La naturaleza de estas advertencias se detalla en la Tabla 3. Las entradas etiquetadas con dichas advertencias no indican automáticamente que los cálculos sean inválidos. Por ejemplo, aunque se espera que los desplazamientos de los átomos de la superficie durante la relajación sean inferiores al 5 % (ref. 33),

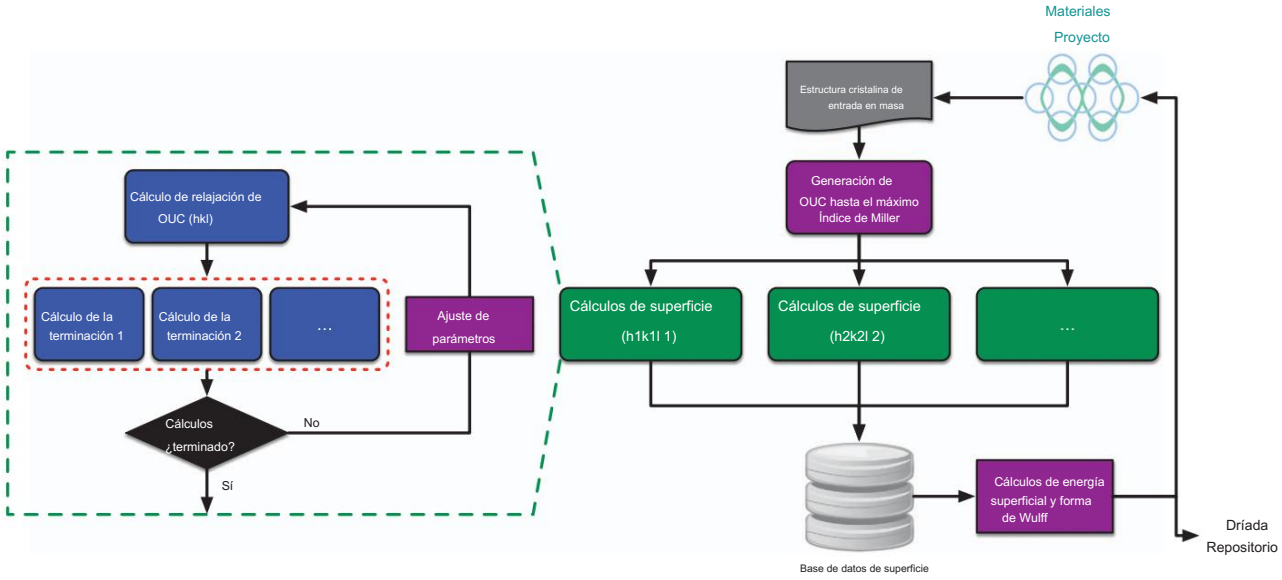

Figura 3. Flujo de trabajo de alto rendimiento. Esquema de la infraestructura de alto rendimiento para el cálculo de las energías superficiales de sólidos cristalinos elementales. Los bloques discontinuos representan los pasos del flujo de trabajo ejecutados en paralelo.

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

Llave	Tipo de datos	Descripción
fórmula	cadena	Fórmula química
id_del_material	cadena	Identificadores para entradas en el Proyecto de Materiales
organismo polimorfo	entero	Rango de estabilidad del polimorfo (0 es el estado fundamental)
grupo espacial	cadena	Símbolo y número del grupo espacial internacional
e_sobre_el_casco	flotar	Energía sobre el casco reportada por Materials Project.

Tabla 1. Los metadatos de un material particular.

Propiedad	Llave	Tipo de datos	Unidad	Descripción
Energía superficial ponderada, $\bar{\gamma}$	energía superficial ponderada	flotar	J m^{-2}	Energía superficial ponderada por las áreas de las facetas de la forma de Wulff.
	energía superficial ponderada EV POR ANG2		eV Å^{-2}	
Anisotropía, α_γ	anisotropía de superficie	flotar		Medida de la anisotropía de las energías superficiales ponderada por importancia relativa.
Factor de forma, η	factor de forma	flotar		Medida de la anisotropía basada en la geometría de la forma de Wulff.
Superficies	superficies	lista		Lista de subentradas que describen una superficie individual.
Energía superficial, γhkl*	energía superficial	flotar	J m^{-2}	Energía superficial correspondiente a la terminación o reconstrucción más estable.
	energía superficial EV POR ANG2		eV Å^{-2}	
Índice de Miller (hkl)*	índice de miller	lista		Índice de Miller de la losa.
ID de tarea*	tareas	entero		Identificación de la tarea del cálculo de OUC y losa de la que se derivaron las propiedades de la subentrada.
Reconstrucción*	se_reconstruye	booleano		Indica si las propiedades de la subentrada corresponden a una losa reconstruida
Fracción de área de superficie de Wulff*	fracción de área	flotar		Fracción del área superficial de la forma de Wulff ocupada por las facetas de la superficie.
Estructura de losa*	estructura	cadena		Losa utilizada para modelar la superficie como Archivo de Información Cristalográfica (cif).

Tabla 2. Propiedades superficiales de un cristal. Las propiedades marcadas con * corresponden a cada superficie.

Nombre de advertencia	Descripción
|vol_relativo_a_granel| > 1%	La relajación del volumen OUC es mayor al 1%.
|relatividad_del_sitio_de_losa| > 10%	La relajación de las losas es mayor al 10%.
|relatividad_del_sitio_de_losa| > 5%	La relajación de las losas es mayor al 5%.
energía superficial negativa	La energía superficial es negativa.

Tabla 3. Las posibles advertencias etiquetadas para cada cálculo de superficie.

La relajación de la superficie (110) del diamante Si excede este valor debido a su tendencia a reconstruirse.
lograr estabilidad.

Disponibilidad del código
Pymatgen es el código de análisis de materiales principal utilizado en este trabajo, y la construcción de la superficie y
Este paquete implementa algoritmos de generación de archivos de entrada. Tanto pymatgen como el error del custodio...
Las bibliotecas de recuperación son software de código abierto del MIT (Instituto Tecnológico de Massachusetts).
Licencia. El flujo de trabajo de alto rendimiento se implementó utilizando la biblioteca FireWorks, que se encuentra disponible de forma gratuita.
accesible bajo una GPL modificada (Licencia Pública General GNU)60. Todos los algoritmos implementados, incluyendo
La generación de modelos y el cálculo de la forma Wulff se complementan con un conjunto completo de pruebas unitarias.
Los códigos de software de código abierto también se prueban continuamente mediante un servicio de integración continua. El VASP
El código DFT utilizado está protegido por derechos de autor de la Universidad de Viena, Austria, y es accesible bajo una licencia paga.

Registros de datos

Se ha desarrollado una aplicación web fácil de usar, Crystalium, para permitir a los usuarios explorar eficientemente el
Formas de Wulff, energías superficiales y estructuras de losa de los polimorfos investigados. Esta aplicación web es...
en http://crystalium.materialsvirtuallab.org (se muestra una captura de pantalla en la Fig. 4). Además, la superficie
Las energías y las formas de Wulff también están disponibles en el sitio web del Proyecto de Materiales (https://www.
materialsproject.org) en las páginas de datos detallados de cristales específicos. También se incluyen dos archivos de datos JSON.
Disponible en un repositorio Dryad (Cita de datos 1). El primer archivo de datos contiene el conjunto completo de metadatos.
y propiedades de superficie para todos los materiales estudiados hasta ahora, mientras que el segundo contiene la entrada clave de VASP.
Parámetros y datos de salida para todos los cálculos de losas realizados en este estudio.

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

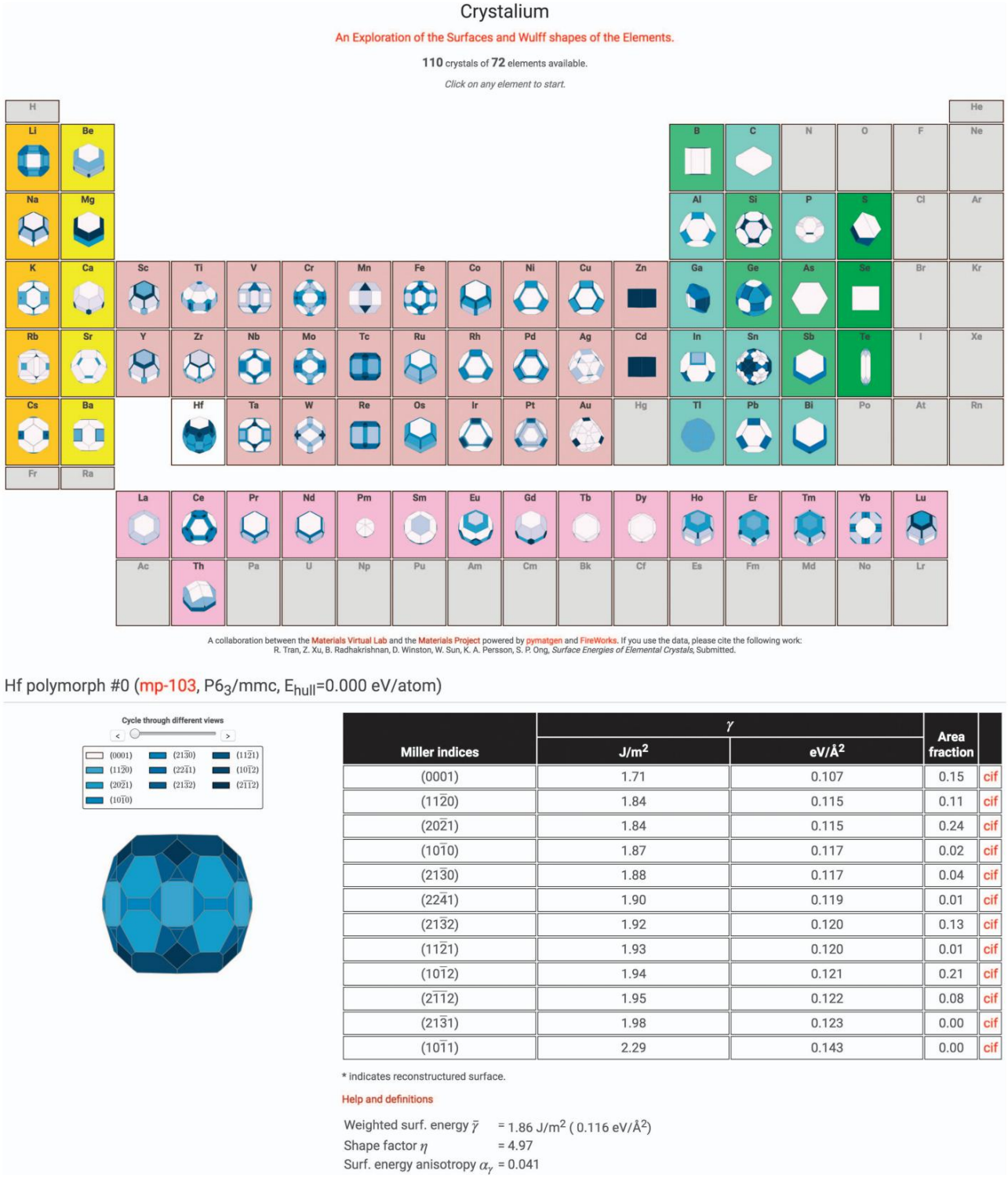
Crystalium
An Exploration of the Surfaces and Wulff shapes of the Elements.
110 crystals of 72 elements available.
Click on any element to start.
A collaboration between the Materials Virtual Lab and the Materials Project powered by pymatgen and FireWorks. If you use the data, please cite the following work:
R. Tran, Z. Xu, B. Radhakrishnan, D. Winston, W. Sun, K. A. Persson, S. P. Ong, Surface Energies of Elemental Crystals, Submitted.
Hf polymorph #0 (mp-103, P6$_3$/mmc, E$_{hull}$=0.000 eV/atom)
Cycle through different views
(0001) (21$\bar{3}$0) (11$\bar{2}$1)
(11$\bar{2}$0) (22$\bar{4}$1) (10$\bar{1}$2)
(20$\bar{2}$1) (21$\bar{3}$2) (2$\bar{1}\bar{1}$2)
(10$\bar{1}$0)
Miller indices | γ J/m² | γ eV/Å² | Area fraction
(0001) 1.71 0.107 0.15 cif
(11$\bar{2}$0) 1.84 0.115 0.11 cif
(20$\bar{2}$1) 1.84 0.115 0.24 cif
(10$\bar{1}$0) 1.87 0.117 0.02 cif
(21$\bar{3}$0) 1.88 0.117 0.04 cif
(22$\bar{4}$1) 1.90 0.119 0.01 cif
(21$\bar{3}$2) 1.92 0.120 0.13 cif
(11$\bar{2}$1) 1.93 0.120 0.01 cif
(10$\bar{1}$2) 1.94 0.121 0.21 cif
(2$\bar{1}\bar{1}$2) 1.95 0.122 0.08 cif
(21$\bar{3}$1) 1.98 0.123 0.00 cif
(10$\bar{1}$1) 2.29 0.143 0.00 cif
* indicates reconstructured surface.
Help and definitions
Weighted surf. energy $\bar{\gamma}$ = 1.86 J/m² (0.116 eV/Å²)
Shape factor η = 4.97
Surf. energy anisotropy α_γ = 0.041

Figura 4. Aplicación web Crystalium. Captura de pantalla de la aplicación web Crystalium.

Formato de

archivo Las propiedades de la superficie de cada material se almacenan como un documento JSON individual (Cita de datos 1). El material se describe mediante sus metadatos, que contienen información como el grupo espacial, la fórmula, un identificador único del Proyecto de Materiales (mp-id), la energía por átomo sobre la envoltura (una medida de la estabilidad relativa del cristal en masa) y el número de polimorfos. La Tabla 1 contiene una descripción de los metadatos. Un documento JSON similar proporciona los parámetros de entrada y los datos de salida clave de VASP para cada cálculo de losa, que también se identifica de forma única mediante el mp-id del cristal.

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

Propiedades
El documento JSON para cada entrada contiene una lista organizada de subentradas que describe las propiedades de cada superficie en detalle. Cada subentrada contiene información como el índice de Miller, la energía superficial y la fracción del área superficial de la forma de Wulff ocupada por esta faceta. Para cada índice de Miller, se proporciona en cada subentrada la terminación de energía superficial más baja, incluyendo entre diferentes reconstrucciones investigadas cuando corresponda. La estructura de losa utilizada para modelar la superficie está disponible como una cadena en el documento JSON en el formato de un Archivo de Información Cristalográfica (cif), que también se puede descargar a través del sitio web del Proyecto de Materiales y la aplicación web Crystalium. Además, se dan la energía superficial ponderada (ecuación (2)), el factor de forma (ecuación (3)) y la anisotropía de la superficie (ecuación (4)). La Tabla 2 proporciona una descripción completa de todas las propiedades disponibles en cada entrada, así como su clave JSON correspondiente.

Validación Técnica: Los datos
se validaron mediante una exhaustiva comparación con energías superficiales obtenidas de experimentos y otros estudios de DFT publicados en la literatura. Debido a las limitaciones de la literatura disponible, solo se compararon los datos sobre las fases del estado fundamental.

Comparación con mediciones experimentales La determinación
experimental de la energía superficial generalmente implica medir la tensión superficial del líquido y la energía interfacial sólido-líquido del material20 para estimar la energía superficial del sólido a la temperatura de fusión, que luego se extrapola a 0 K bajo aproximaciones isotrópicas. Las energías superficiales para facetas de cristales individuales rara vez están disponibles experimentalmente. La Figura 5 compara las energías superficiales ponderadas de todos los cristales (ecuación (2)) con valores experimentales en la literatura20,23,26–28. Debe notarse que hemos adoptado los últimos valores experimentales disponibles para comparación, es decir, los valores se obtuvieron de la revisión de 2016 de Mills et al.27, seguido de Keene28, y finalmente Niessen et al.26 y Miller y Tyson20. Se ajustó una línea de regresión lineal de un factor γDFT ¼ γEXP þ c para los puntos de datos. La elección del ajuste de un solo factor está motivada por el hecho de que los modelos de enlaces rotos estándar muestran que existe una relación directa entre las energías superficiales y las energías cohesivas, y estudios previos no han encontrado evidencia de que los errores de DFT en la energía cohesiva se escalen con la magnitud de la energía cohesiva en sí61.

Encontramos que las energías superficiales ponderadas por DFT concuerdan excelentemente con los valores experimentales y con una subestimación media de sólo 0,01 J m− 0,27 J m− ^{2} un error estándar de la estimación (SEE) de ^{2}El coeficiente de correlación de Pearson r es 0,966. Los cristales con superficies que se sabe que experimentan una reconstrucción significativa tienden a presentar errores en las energías superficiales ponderadas mayores que el SEE.

Las diferencias entre las energías superficiales calculadas y experimentales pueden atribuirse a tres factores principales. En primer lugar, existen incertidumbres en las energías superficiales experimentales. Los valores experimentales obtenidos por Miller y Tyson20 son extrapolaciones de temperaturas extremas superiores al punto de fusión.
La energía superficial de Ge, Si62, Te63 y Se64 se determinó a 77, 77, 432 y 313 K respectivamente mientras

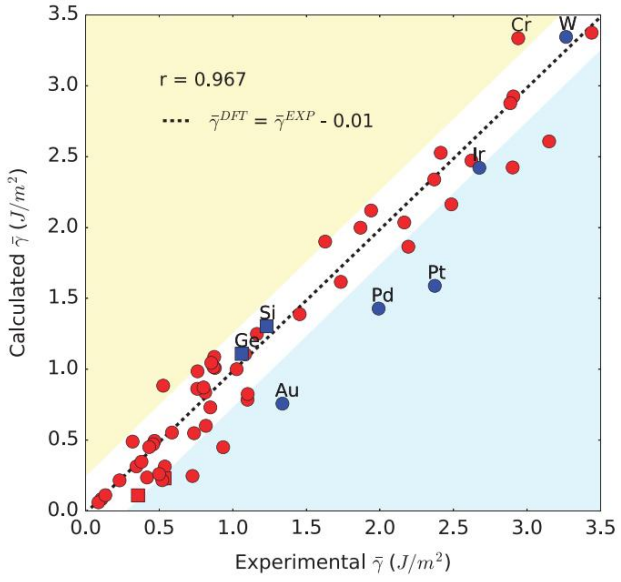

Figura 5. Comparación con las energías superficiales experimentales. Gráfica de las energías superficiales ponderadas experimentales frente a las calculadas para cristales elementales en estado fundamental. Las estructuras que se sabe que se reconstruyen presentan puntos de datos azules, mientras que los puntos de datos cuadrados corresponden a no metales. Los puntos que se encuentran dentro del error estándar de la estimación (±0,27 J m−) ^{2}) se encuentran en la región blanca.

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

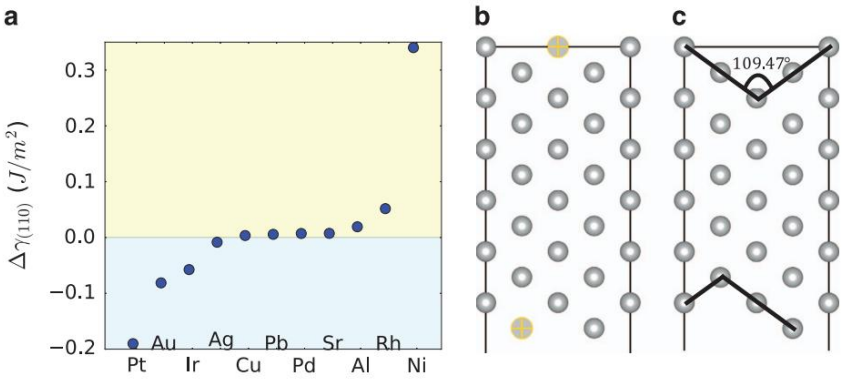

Figura 6. Reconstrucción de la superficie Fcc (110). Comparación de la superficie reconstruida y no reconstruida (110). Superficies para materiales fcc. (a) Gráfico de la diferencia en energía superficial Δγ110 ¼ γreconstruct - γrelajado entre el Superficie reconstruida y no reconstruida (110) de metales fcc. Los valores negativos indican una tendencia a reconstruir. (b) Se muestran modelos no reconstruidos y (c) reconstruidos para una losa fcc (110).

Índice de Miller	Sin reconstruir		Reconstruido		Experimento	
	–	F^{A}_{hkl}	–	F^{A}_{hkl}	–	Reconstrucción
(111)	1.57	0.09	1.30	0,45	1.23	(2 × 1)
(110)	1.76	0.00	1.51	0.00	1.43	(1 × 1)
(100)	2.13	0.00	1.28	0,36	1.36	p (2 × 1)

Tabla 4. Comparación entre las energías superficiales no reconstruidas y reconstruidas calculadas, y energías superficiales experimentales (en J m^{-2}) para varias superficies de Si. Las fracciones de área calculadas se basan en también se proporcionan las formas de Wulff.

La energía de la superficie (0001) del grafito pirolítico se determinó utilizando la técnica de la gota sésil. a altas temperaturas65. Además, la posibilidad de contaminación por elementos tensioactivos como Como el oxígeno puede provocar valores de tensión superficial más bajos. Como resultado, un valor más alto de tensión superficial... A menudo se sostiene que el valor medido en experimentos es el más preciso27,28 .

En segundo lugar, las limitaciones de la función de correlación-intercambio utilizada también pueden causar discrepancias35,66. Aunque la diferencia promedio entre las energías superficiales PBE calculadas en este trabajo y las experimentales Las energías superficiales son muy pequeñas (0,01 J m^{-2}), sin embargo, hay diferencias no despreciables para valores específicos. elementos. Además, este estudio no tiene en cuenta los efectos de las fuerzas de Van der Waals en materiales como el grafito donde es la interacción dominante entre las capas de grafeno en el (0001) dirección. De las 1.000 superficies diferentes estudiadas, solo las superficies (0001) de los dos polimorfos de grafito tienen energías superficiales negativas no físicas, lo cual también fue observado previamente por Ooi et al.67.

Finalmente, las reconstrucciones de superficie también podrían contribuir a las diferencias entre los datos calculados y valores experimentales. Para comprender el efecto de las reconstrucciones en las energías superficiales, comparamos los Energía superficial de las superficies metálicas fcc relajadas (110) de la base de datos a la reconstruida configuración descrita por Zhang et al.43, como se muestra en la Fig. 6. Encontramos que la reconstrucción de la fila faltante Se prevé que sea favorecida (menor en energía) sobre la superficie no reconstruida solo para Pt, Au e Ir, de acuerdo con resultados experimentales y computacionales previos43,68. Incluso para las superficies que someterse a una reconstrucción, las diferencias entre las energías superficiales reconstruidas y no reconstruidas son relativamente pequeñas (0,2 J m^{-2}) en metales.

Casos excepcionales de reconstrucción con grandes diferencias entre lo relajado y lo reconstruido Existen energías superficiales. Se sabe que semiconductores como Si y Ge tienen energías superficiales significativamente menores. Energías en su estado reconstruido. Las energías superficiales experimentales, reconstruidas y relajadas para Si se muestran en la Tabla 4. Las energías superficiales reconstruidas son mucho más cercanas a las encontradas experimentalmente. que las energías superficiales no reconstruidas. La superficie reconstruida (111) en particular muestra la mayor Diferencia de energía (0,85 J m^{-2}). Cabe señalar que este trabajo de HT no exploró la conocida diferencia de energía 7 × 7. reconstrucción69,70 de la superficie Si(111) debido a la gran supercelda requerida.

Comparación con estudios computacionales previos

La Tabla 5 presenta una comparación de las energías superficiales calculadas en este trabajo con las calculadas en Trabajos previos. A diferencia de la comparación con datos experimentales, las comparaciones específicas de la superficie son Se presenta para demostrar la precisión de los datos. Se proporciona un valor experimental "promedio" donde disponible para referencia. A pesar de que los valores de la literatura provienen de estudios con datos muy diferentes

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

Material	Superficie	Energía superficial γ (J m−2)		
		Esta obra	DFT anterior	Experimental
Ni	(110)	2.29	2.37 (ref. 35)–2.31 (ref. 25)	2,44* (ref. 27)
	(210)	2.4	2.43 (ref. 25)	
	(100)	2.21	2,25 (ref. 25)–2,43 (ref. 35)	
	(221)	2.17	2.2 (ref. 25)	
	(111)	1.92	2,01 (ref. 35)–1,95 (ref. 25)	
Mg	$10\bar{1}0$	0.6	0,78 (ref. 35)	0,82* (ref. 28)
	(0001)	0,54	0,54 (ref. 71)–0,79 (ref. 35)	
——	(110)	0.31	0,38 (ref. 35)–0,37 (ref. 80)	0,34* (ref. 28)
	(100)	0,32	0,37 (ref. 80)–0,35 (ref. 35)	
	(111)	0,39	0,45 (ref. 80)–0,4 (ref. 35)	
Pt	(110)	1.68	2,91 (ref. 34)–2,27 (ref. 35)	2.37* (ref. 28)
	(100)	1.84	2,73 (ref. 35)–2,23 (ref. 80)	
	(111)	1.48	2,35* (ref. 71)–1,47 (ref. 71)	
Sr	(110)	0,41	0,47 (ref. 80)–0,43 (ref. 35)	0,38* (ref. 28)
	(100)	0,35	0,41 (ref. 35)–0,39 (ref. 80)	
	(111)	0.34	0,5 (ref. 81)–0,4 (ref. 80)	
Mes	(110)	2.8	2,92 (ref. 82)–3,69 (ref. 81)	2.07* (ref. 27)
	(100)	3.18	3.34 (ref. 82)–3.84 (ref. 35)	
	(211)	3.4	3.11 (ref. 82)–3.6 (ref. 35)	
	(111)	2.96	3.24 (ref. 82)–3.74 (ref. 35)	
Bi	(0001)	0,17	N / A	0,43* (ref. 28)
Li	(110)	0.5	0,56* (ref. 35)–0,3 (ref. 78)	0,7* (ref. 28)
	(100)	0,46	0,52 (ref. 35)–0,32 (ref. 78)	
	(111)	0,54	0,62* (ref. 35)–0,34 (ref. 78)	
Pb	(100)	0,28	0,64* (ref. 37)–0,32 (ref. 37)	0,52* (ref. 28)
	(110)	0.33	0,72 (ref. 34)–0,33 (ref. 35)	
	(111)	0,25	0,6 (ref. 34)–0,26* (ref. 37)	
Re	(0001)	2.58	4.21 (ref. 35)	2,52* (ref. 27)
	$\delta\bar{1}010$	2.86	4.63 (ref. 35)	
Ge	(110)	0,97	1.17 (ref. 40)	0,68* (ref. 27)
	(100)	0,87	1.71 (ref. 40)	
	(111)	1.11	1.3 (ref. 40)	
Lu	(0001)	1.13	1.6 (ref. 35)	1.08* (ref. 28)
	$\delta\bar{1}010$	1.05	1.42 (ref. 35)	
Fe	(110)	2.45	3.0 (ref. 80)–2.43 (ref. 35)	2.41* (ref. 27)
	(100)	2.5	3.12 (ref. 80)–2.22 (ref. 35)	
	(211)	2.61	2.59 (ref. 35)	
	(111)	2.73	3,28 (ref. 80)–2,73 (ref. 35)	
Georgia	(001)	0,57	N / A	0,02* (ref. 27)
Por favor	$10\bar{1}2$	1.0	N / A	0,88* (ref. 28)
——	$10\bar{1}0$	1.2	1.53 (ref. 35)	1.16* (ref. 28)
	(0001)	1.27	1.83 (ref. 35)	

Tabla 5. Comparación de los valores de alto rendimiento con los valores experimentales y calculados para los materiales.

Se proporciona un rango de valores basado en los valores más bajos y más altos encontrados en la literatura . 37GGA (pseudopotenciales de Hamann); 35GGA (FCD); 34LDA (FP-KKR); 25GGA-PBE; 40LDA (Vanderbilt pseudopotenciales); 80GGA-PBEsol; 71GGA-PBE (FP-LAPW); 81GGA-PBEsol; 82Formulación de densidad local; 78PWGGA (LCGTO); *Véase la referencia en este documento.

parámetros, incluida la elección de la función de correlación de intercambio, elección de pseudopotencial/electrón completo cálculos, etc., encontramos que los valores calculados en este trabajo difieren de estos valores de la literatura solo en

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

2–13% (refs. 25, 71). La superficie (111) del Pt fcc de Da Silva et al.71 presenta la mayor diferencia (13%). Esto se debe principalmente al uso de pseudopotenciales en este estudio, mientras que Da Silva et al.71 utilizó un método basado en electrones.

En general, encontramos que las energías superficiales calculadas en este trabajo son ligeramente inferiores a las del trabajo de Vitos et al.35 Esta observación puede atribuirse a la aproximación de esfera atómica utilizada en los cálculos de FCD de Vitos et al.35, que se sabe que dificulta la relajación en la superficie, lo que conduce a valores de energía superficial más altos71. Además, nuestras energías superficiales calculadas son significativamente inferiores a las calculadas utilizando la funcional de aproximación de densidad local (LDA) en la literatura, lo que puede atribuirse a la propensión de la funcional LDA a sobreenlazar en comparación con la funcional GGA utilizada en este trabajo72–75.

Los planos con la mayor densidad atómica por unidad de área de los materiales fcc, bcc y hcp son los planos {111}, {110} y {0001}, respectivamente. Según el modelo clásico de enlace roto, la minimización de los enlaces rotos en estas superficies da como resultado que estas tengan el γ más bajo 76,77. Nuestros resultados respaldan este modelo empírico, con algunas excepciones notables. Por ejemplo, las superficies (0001) para hcp Sc e Y y la superficie (110) para Li no son las superficies de menor energía entre las facetas investigadas. Estas excepciones también se observan en Vitos et al.35 para diversos materiales y en otros estudios previos de primer principio para la superficie (110) de Li35,78,79.

Notas de uso: La

base de datos de este estudio constituye la colección más extensa de energías superficiales calculadas para sólidos cristalinos elementales hasta la fecha. Al combinarse con técnicas de minería de datos y aprendizaje automático, la base de datos permite revelar tendencias en fenómenos superficiales y guiar la selección de materiales potencialmente interesantes para las propiedades superficiales deseadas. Por ejemplo, las estructuras y energías superficiales relajadas de muchos metales, en particular los nobles, serán de gran utilidad en el estudio de la absorción superficial de moléculas, un aspecto fundamental en la catálisis. La consideración de las superficies es especialmente crucial en el diseño de nanomateriales, donde los efectos superficiales tienden a influir en el rendimiento y las propiedades generales. También prevemos que los datos presentados serán un punto de partida útil para el estudio de las interfaces entre materiales, ya sea dentro del mismo material (p. ej., límites de grano) o entre materiales diferentes. Próximamente, los usuarios del Proyecto de Materiales podrán cargar reconstrucciones propuestas experimentalmente para mejorar aún más la integridad de la base de datos. Además, futuras mejoras incluirán las propiedades superficiales no solo de elementos, sino también de compuestos multicomponentes (incluidas las aleaciones).

Referencias 1.

Hammer, B. y Norskov, J. K. Por qué el oro es el más noble de todos los metales. Nature 376, 238-240 (1995).
2. Greeley, J., Norskov, J.K. y Mavrikakis, M. Estructuras electrónicas y catálisis en superficies metálicas. Revista Anual de Química Física 53, 319–348 (2002).
3. Hammer, B. y Norskov, J. Ciencia teórica de superficies y catálisis: cálculos y conceptos. Avances en Catálisis 45, 71–129 (2000).
4. N0rskov, JK, Bligaard, T., Rossmeisl, J. y Christensen, CH: Hacia el diseño computacional de catalizadores sólidos. Nature Química 1, 37–46 (2009).
5. Stamenkovic, V. et al. Cambio de la actividad de los electrocatalizadores para la reducción de oxígeno mediante el ajuste de la estructura electrónica de la superficie. Angewandte Chemie - Edición internacional 45, 2897–2901 (2006).
6. Bligaard, T. et al. La relación de Bronsted-Evans-Polanyi y la curva volcánica en catálisis heterogénea. Journal of Catalysis 224, 206–217 (2004).
7. Logadottir, A. et al. La relación de Br0nsted-Evans-Polanyi y el diagrama de Volcán para la síntesis de amoníaco sobre metales de transición Catalizadores. Revista de Catálisis 197, 229–231 (2001).
8. Tang, QL y Luo, QH Adsorción de CO2 en ZnO: un efecto de la estructura superficial a partir de cálculos DFT+ U. Journal of Physical Chemistry C 117, 22954–22966 (2013).
9. Tang, Q.-L., Zou, W.-T., Huang, R.-K., Wang, Q. y Duan, X.-X. Efecto de la interfaz de los componentes en la síntesis de metanol sobre Cu/ZnO a partir de CO /H : un análisis microcinético basado en cálculos de DFT + U. Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 7317–7333 (2015).
10. Auffan, M. et al. Hacia una definición de nanopartículas inorgánicas desde una perspectiva ambiental, de salud y seguridad. Nature nanotecnología 4, 634–641 (2009).
11. Volonakis, G., Tsetseris, L. y Logothetidis, S. Propiedades electrónicas y estructurales de TiB2: efectos en masa, superficie y nanoescala. Ciencia e ingeniería de materiales B: Materiales de estado sólido para tecnología avanzada 176, 484–489 (2011).
12. Boles, MA, Ling, D., Hyeon, T. y Talapin, D.V. La ciencia de la superficie de los nanocristales. Nature Materials 15, 141–153 (2016).
13. Dos Santos, MC, Kesler, O. y Reddy, ALM. Nanomateriales para la conversión y el almacenamiento de energía. Journal of Nanomaterials 42, 3127–3171 (2013).
14. Sharma, P., Ganti, S. y Bhate, N. Efecto de las superficies en el estado elástico dependiente del tamaño de las nanoinhomogeneidades. Física Aplicada Cartas 82, 535–537 (2003).
15. Kang, S., Mo, Y., Ong, SP y Ceder, G. Estabilización de óxidos de sodio a nanoescala: Implicaciones para baterías de Na-O2. Nano Letters 14, 1016–1020 (2014).
16. Navrotsky, A. Energética de óxidos de nanopartículas: interacción entre la energía superficial y el polimorfismo. Geochemical Transactions 4, 34–37 (2003).
17. Sun, W., Jayaraman, S., Chen, W., Persson, KA y Ceder, G. Nucleación de aragonito metaestable CaCO3 en agua de mar. Actas de la Academia Nacional de Ciencias 112, 3199–3204 (2015).
18. Barnard, AS y Curtiss, LA. Predicción de transiciones de fase y forma de nanopartículas de TiO controladas por la química de superficie. Nano Letters 5, 1261–1266 (2005).
19. Ballufi, RW, Allen, SM y Carter, WC Cinética de materiales (John Wiley & Sons, 2005).
20. Miller, W. y Tyson, W. Energías libres superficiales de metales sólidos. Estimación a partir de mediciones de tensión superficial de líquidos. Surface Science 62, 267–276 (1977).
21. Gilman, JJ. Mediciones directas de las energías superficiales de cristales. Journal of Applied Physics 31, 2208–2218 (1960).
22. Metois, JJ y Müller, P. Determinación de la energía superficial absoluta. Surface Science 548, 13–21 (2004).

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

23. Eaglesham, DJ, White, AE, Feldman, L. C, Moriya, N. y Jacobson, DC Forma de equilibrio del Si. Physical Review Letters 70, 1643–1646 (1993).
24. Bombis, C, Emundts, A., Nowicki, M. y Bonzel, HP Energías libres superficiales absolutas de Pb. Surface Science 511, 83–96 (2002).
25. Zhang, W.-B., Chen, C. y Zhang, S.-Y. Forma cristalina de equilibrio de Ni a partir de los primeros principios. The Journal of Physical Chemistry C 117, 21274–21280 (2013).
26. Niessen, AK, de Boer, FR, Boom, R., Mattens, WCM y Miedema, AR Cohesión en metales (Elsevier Scientific Pub. Co., 1988).
27. Mills, KC y Su, YC. Revisión de datos de tensión superficial para elementos metálicos y aleaciones: Parte 1 - Metales puros. International Materials Reviews 51, 329–351 (2016).
28. Keene, BJ. Revisión de datos sobre la tensión superficial de metales puros. International Materials Reviews 38, 157–192 (1993).
29. Harrison, MJ et al. Reconstrucción de superficie inducida por adsorbato y cambios de tensión superficial en Cu (100) O: experimento y teoría. Physical Review B - Física de la materia condensada y los materiales 74, 1–7 (2006).
30. Bonzel, HP, Yu, DK y Scheffier, M. La forma cristalina de equilibrio tridimensional de Pb: resultados recientes de la teoría y experimento. Física Aplicada A: Ciencia y Procesamiento de Materiales 87, 391–397 (2007).
31. Wojciechowski, KF. Energía superficial de los metales: teoría y experimentación. Surface Science 437, 285–288 (1999).
32. Kosova, N., Devyatkina, E., Slobodyuk, A. y Kaichev, V. Estudio de la química superficial de LiCoO recubierto con alúmina. Iónica de estado sólido 179, 1745–1749 (2008).
33. Methfessel, M., Hennig, D. y Scheffier, M. Tendencias de las relajaciones superficiales, energías superficiales y funciones de trabajo de los metales de transición 4d. Physical Review B 46, 4816–4829 (1992).
34. Galanakis, I., Papanikolaou, N. y Dederichs, PH Aplicabilidad de la regla del enlace roto a la energía superficial de los metales ligeros. Ciencia de superficies 511, 1–12 (2002).
35. Vitos, L., Ruban, AV, Skriver, HL y Kolla, J. La energía superficial de los metales. Ciencia de la superficie 411, 186–202 (1998).
36. Vitos, L., Kollar, J. y Skriver, H. Esquema de densidad de carga completa con una corrección de energía cinética: Aplicación al estado fundamental Propiedades de los metales 4d. Physical Review B 55, 13521–13527 (1997).
37. Yu, D. y Scheffier, M. Estudio de primeros principios de superficies de bajo índice de plomo. Physical Review B - Materia Condensada y Materiales Física 70, 1–8 (2004).
38. Schlier, RE y Farnsworth, HE. Estructura y características de adsorción de superficies limpias de germanio y silicio. The Journal de Física Química 30, 917 (1959).
39. Harrison, WA Reconstrucción de superficies en semiconductores. Surface Science 55, 1–19 (1976).
40. Stekolnikov, A., Furthmüller, J. y Bechstedt, F. Energías superficiales absolutas de semiconductores del grupo IV: Dependencia de Orientación y reconstrucción. Physical Review B 65, 1–10 (2002).
41. Jain, A. et al. Comentario: El Proyecto de Materiales: Un enfoque del genoma de los materiales para acelerar la innovación de los materiales. Materiales I PL 1, 011002 (2013).
42. Sun, W. y Ceder, G. Creación y convergencia eficiente de losas superficiales. Surface Science 617, 53–59 (2013).
43. Zhang, JM, Zhang, MY y Xu, KW Reconstrucción de filas faltantes en tres superficies de bajo índice, a menudo metales FCC. Cristal Investigación y Tecnología 44, 275–280 (2009).
44. Crljen, Z., Sokcevic, D., Brako, R. y Lazic, P. Cálculos DFT de superficies (111) de Au, Cu y Pt: estabilidad y reconstrucción. Vacío 71, 101–106 (2003).
45. Ong, SP et al. La Interfaz de Programación de Aplicaciones (API) de Materiales: Una API simple, flexible y eficiente para datos de materiales basada en los principios de Transferencia de Estado Representacional (REST). Ciencia de Materiales Computacionales 97, 209–215 (2015).
46. Ong, SP et al. Python Materials Genomics (pymatgen): una biblioteca de Python robusta y de código abierto para el análisis de materiales. Ciencia de materiales computacionales 68, 314–319 (2013).
47. Iddir, H., Komanicky, V., You, H., Zapol, P. y Ogut, S. Forma de nanopartículas de platino soportadas en SrTiO3: Experimento y teoría. J. Phys. Chem. C 14782–14789 (2007).
48. Kresse, G. y Furthmüller, J. Esquemas iterativos eficientes para cálculos de energía total ab initio utilizando un conjunto base de ondas planas. Física Reseña. B, Condensed Matter 54, 11169–11186 (1996).
49. Kohn, W. y Sham, L. J. Ecuaciones autoconsistentes que incluyen efectos de intercambio y correlación*. Physical Review B 140, 1133–1138 (1965).
50. Kresse, G. y Furthmuller, J. Software VASP, Viena. Physical Review B 54, 169 (1996).
51. Hacene, M. et al. Aceleración de los cálculos de la estructura electrónica de VASP mediante unidades de procesamiento gráfico. Journal of Computational Química 33, 2581–2589 (2012).
52. Hutchinson, M. y Widom, M. VASP en una GPU: aplicación a cálculos de intercambio exacto de la estabilidad del boro elemental. Comunicaciones de Física de Computadoras 7, 1422–1426 (2011).
53. Blochl, PE. Método de onda aumentada del proyector. Physical Review B 50, 17953–17979 (1994).
54. Perdew, J., Burke, K. y Ernzerhof, M. Aproximación de gradiente generalizada simplificada. Physical Review Letters 77, 3865–3868 (1996).
55. Methfessel, M. y Paxton, AT. Muestreo de alta precisión para la integración de la zona de Brillouin en metales. Physical Review B 40, 3616–3621 (1989).
56. Johnson, S. y Joannopoulos, J. Métodos iterativos en bloque en el dominio de la frecuencia para las ecuaciones de Maxwell en una base de ondas planas. Óptica Express 8, 173–190 (2001).
57. Einstein, TL. Forma de equilibrio de los cristales. En Manual de Crecimiento Cristalino: Segunda Edición 1, 215–264 (2014).
58. Miracle-Sole, S. Formas de facetas en un cristal de Wulff. en Resultados matemáticos en mecánica estadística, Coloquio satélite de STATPHYS 20 83-101 (World Scientific, 1998). <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00706899>.
59. Heilmann, P., Heinz, K. y Müller, K. Superestructuras de las superficies limpias de Pt(100) e Ir(100). Surface Science 83, 487–497 (1979).
60. Jain, A. et al. FireWorks: un sistema de flujo de trabajo dinámico diseñado para aplicaciones de alto rendimiento. Concurrencia y computación: Práctica y Experiencia 27, 5037–5059 (2015).
61. Lejaeghere, K., Van Speybroeck, V., Van Oost, G. y Cottenier, S. Estimaciones de error para la teoría del funcional de la densidad del estado sólido Predicciones: Una visión general de los cristales elementales en estado fundamental. Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences 39, 1–24 (2014).
62. Jaccodine, RJ. Energía superficial del germanio y el silicio. Journal of The Electrochemical Society 110, 524 (1963).
63. Osteraas, AJ, Olsen, DA, Moravec, RW y Osteraas, AJ Los valores críticos de tensión superficial de los elementos del grupo VIA. Revista de química física 71, 4464–4466 (1967).
64. Guisbiers, G., Arscott, S., Gaudet, M., Belfiore, A. y Snyders, R. Determinación de la energía superficial del selenio a partir de consideraciones dependientes del tamaño. en Nanoelectronics Conference 105–109 (IEEE, 2013) <http://ieeexplore.ieee.org/document/6465968/>.
65. Eustathopoulos, N., Nicholas, M. y Drevet, B. Serie de materiales de Pergamon: mojabilidad a altas temperaturas (Pergamon-Elsevier Ciencia LTD, 1999).
66. Perdew, JP et al. Átomos, moléculas, sólidos y superficies: Aplicaciones de la aproximación de gradiente generalizada para intercambio y correlación. Physical Review B 46, 6671–6687 (1992).

Machine Translated by Google
www.nature.com/sdata/

67. Ooi, N., Rairkar, A. y Adams, J. B. Estudio funcional de la densidad de las propiedades volumétricas y superficiales del grafito. Carbon 44, 231–242 (2006).
68. Somorjai, GA y Li, Y. Introducción a la química de superficies y catalizadores (John Wiley & Sons, 2010).
69. Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C. y Weibel, E. Reconstrucción 7 × 7 sobre Si(lll) resuelta en el espacio real. Physical Review Letters 50, 120–123 (1983).
70. Brommer, K., Needels, M. y Larson, B. Teoría ab initio de la reconstrucción de la superficie Si(lll)-(7X7). Physical Review Letters 68, 1355–1359 (1992).
71. Da Silva, JLF, Stampfl, C. y Scheffler, M. Propiedades convergentes de superficies metálicas limpias mediante los primeros principios de todos los electrones cálculos. Surface Science 600, 703–715 (2006).
72. Michaelides, A. y Scheffler, M. Una introducción a la teoría de los sólidos elementales cristalinos y sus superficies, en Surface and Interface Science Edn. Vol.1 (ed. K. Wandelt) 13–72 (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Alemania, 2014).
73. Jiang, Q., Lu, HM y Zhao, M. Modelado de energías superficiales de cristales elementales. Journal of Physics: Condensed Matter 16, 521–530 (2004).
74. Binnie, SJ Energética de superficies ab initio: Más allá de la precisión química Tesis doctoral, Univ. College London, Departamento de Física y Astronomía (2011).
75. Goniakowski, J., Holender, JM, Kantorovich, LN y Gillan, M. Influencia de las correcciones de gradiente en la masa y la superficie Propiedades del TiO2 y el SnO2. Physical Review B - Condensed Matter 53, 957–960 (1996).
76. Mackenzie, J., Moore, A. y Nicholas, J. Enlaces rotos en superficies cristalinas atómicamente planas—I. Revista de Física y Química de Sólidos 23, 185–196 (1962).
77. Mackenzie, J. K. y Nicholas, J. F. Enlaces rotos en superficies cristalinas atómicamente planas-II. Revista de Física y Química de Sólidos 23, 197–205 (1962).
78. Doll, K., Harrison, MN y Saunders, VR. Un estudio funcional de la densidad de litio en masa y superficies. Revista de física. Materia condensada 11, 5007–5019 (1999).
79. Kokko, K., Salo, PT, Laihia, R. y Mansikka, K. Cálculos de primeros principios para la función de trabajo y la energía superficial de partículas delgadas. Películas de litio. Surface Science 348, 168–174 (1996).
80. Yoo, S.-H., Lee, J.-H., Jung, Y.-K. y Soon, A. Exploración de mapas estereográficos de energía superficial de metales cúbicos mediante un enfoque eficaz de par-potencial. Physical Review B 93, 1–8 (2016).
81. Ropo, M., Kokko, K. y Vitos, L. Evaluación de la densidad funcional de correlación de intercambio de Perdew-Burke-Ernzerhof revisada Para sistemas metálicos a granel y de superficie. Physical Review B 77, 1–6 (2008).
82. Che, J., Chan, C., Jian, W.-E. y Leung, T. Estructuras atómicas superficiales, energías superficiales y forma cristalina en equilibrio del molibdeno. Physical Review B 57, 1875–1880 (1998).

Cita de datos 1. Tran, R et al. Dryad Digital Repository http://dx.doi.org/10.5061/dryad.f2n6f (2016).

Agradecimientos. Este trabajo contó con el apoyo del Departamento de Energía de los Estados Unidos, Oficina de Ciencias, Ciencias Básicas de la Energía, mediante la subvención n.º EDCBEE. Este trabajo utilizó recursos del Centro Nacional de Cálculo Científico para la Investigación Energética (NERSC), financiado por la Oficina de Ciencias Básicas de la Energía del Departamento de Energía de los Estados Unidos, mediante el contrato n.º DE-AC02-05CH11231.

Contribuciones del autor : RT realizó los cálculos de superficie, construyó el algoritmo de flujo de trabajo y realizó el análisis y la verificación de datos. ZX colaboró en la construcción del algoritmo de flujo de trabajo, escribió el algoritmo para generar las formas Wulff y desarrolló un conjunto consistente de parámetros VASP para los cálculos de superficie.
DW participó en la integración de los datos de superficie HT con el esfuerzo del Proyecto de Materiales.
BR colaboró en la supervisión de la investigación y el análisis y la validación de los datos. WS y KAP colaboraron en la validación de los resultados. SPO es el investigador principal y supervisor general de este estudio. Todos los autores contribuyeron a la discusión y redacción del manuscrito.

Información adicional Intereses financieros en conflicto: Los autores declaran no tener intereses financieros en conflicto.

Cómo citar este artículo: Tran, R. et al. Energías superficiales de cristales elementales. Sci. Data 3:160080 doi: 10.1038/sdata.2016.80 (2016).

Esta obra está licenciada bajo la Licencia Creative Commons Atribución 4.0 Internacional. Las imágenes u otros materiales de terceros que aparecen en este artículo están incluidos bajo la licencia Creative Commons del artículo, a menos que se indique lo contrario en los créditos. Si el material no está incluido bajo la licencia Creative Commons, los usuarios deberán obtener el permiso del titular de la licencia para reproducirlo. Para ver una copia de esta licencia, visite http://creativecommons.org/licenses/by/4.0

Los metadatos asociados con este descriptor de datos están disponibles en http://www.nature.com/sdata/ y se publican bajo la exención CC0 para maximizar la reutilización.

© El autor(es) 2016